

$$v = \frac{2 \cdot f_r \cdot l}{n} \quad (1)$$

где f_r – частота первого резонанса образца, l – длина образца, n – номер гармоники.

Учитывая, что скорость звука прямо пропорциональна частоте резонанса, а точность определения частоты резонанса определялась по частотометру ЧЗ-64, то в работе оценивалось только поведение данного параметра (частоты), так как это напрямую указывало на изменение упругих свойств материала при постоянной температуре.

На (рис.1) представлены температурные зависимости частоты резонанса при различных температурах в поляризованной керамике.

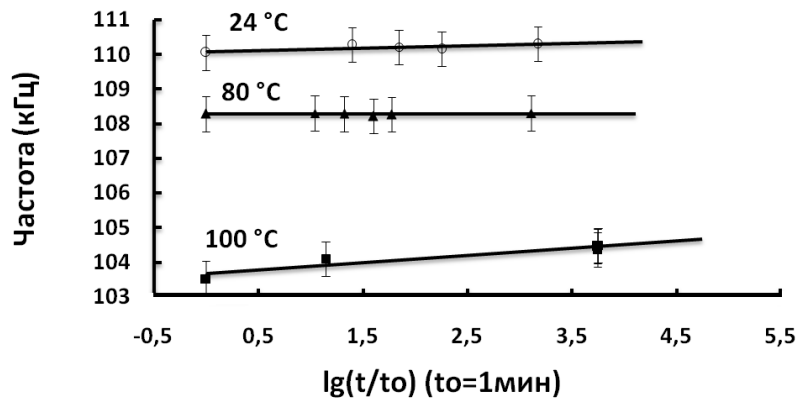


рис.1 Временная зависимость частоты резонанса при определенных температурах в многокомпонентной керамике

Как следует из хода зависимостей практически при всех температурах частоты резонанса не изменяются, или изменяются в пределах ошибки. Таким образом можно утверждать, что упругие свойства материала в диапазоне температур от $T=24\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ не подвергаются фактору старения в отличие от диэлектрических параметров в системе цирконата-титаната свинца и других сегнетопьезокерамик.

Авторы выражают благодарность сотрудникам института высоких технологий и пьезотехники Южного федерального университета за любезно предоставленные образцы испытываемой керамики.

Моделирование из первых принципов электронной структуры сегнетоэлектрического

$\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$

Перевалов Тимофей Викторович

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН

timson@isp.nsc.ru

Тонкие плёнки $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$ являются перспективными кандидаты для энергонезависимой сегнетоэлектрической памяти (Ferroelectric random-access memory, FRAM) [1]. Сегнетоэлектрический эффект этих плёнок связан со стабилизацией нецентросимметричной орторомбической фазы Pbc_{21} . Известно, что ключевым дефектом, определяющим электрофизические характеристики оксидных диэлектриков, являются вакансии кислорода. Было показано, что кислородные вакансии стабилизируют сегнетоэлектрические свойства плёнок HfO_2 . С другой стороны, было показано, что генерация дефектов (вакансий кислорода) в плёнках $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$ в результате многократного переключения ячейки приводит к разрушению сегнетоэлектрической фазы и, как следствие к деградации сегнетоэлектрических свойств [2]. Целью настоящей работы является изучение атомной и электронной структуры кислородных вакансий в $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$, а также их влияния на возможность фазового перехода от стабильной моноклинной фазы $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$ к орторомбической Pbc_{21} .

Надёжным методом изучения атомной и электронной структуры дефектов в твёрдых телах является квантово-химическое моделирование в рамках теории функционала плотности (ТФП). В настоящей работе моделирование проводится с использованием программного пакета Quantum ESPRESSO. Давления фазового перехода из стабильной моноклинной фазы $m\text{-Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$ в различные орторомбические фазы (oI - ($Pbca$), oP - ($Pnma$) и сегнетоэлектрическая of - (Pbc_{21})) рассчитывается, как минимум функции энтальпии системы от внешнего давления.

Для изучения влияния вакансий О на стабилизацию $\text{of-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ рассчитаны фазовые диаграммы зависимости объёма элементарной ячейки от внешнего давления (рис. 1). Увеличение концентрации вакансий О приводит к тому, что диапазон давлений P , при которых структура $\text{of-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ может существовать, сужается: структура претерпевает сильную трансформацию с изменением симметрии для 1 вакансии на 12 атомов при $P > 4$ ГПа, для 1 вакансии на 24 атома – при $P > 13$ ГПа, для вакансии на 36 атомов – при $P > 15$ ГПа. $\text{m-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ оказывается ещё более чувствителен к величине внешнего давления: давления фазового перехода составляют 3, 8, 10, 13 ГПа в расчётах вакансий в суперячейках 12, 24, 36 и 48 атомов, соответственно.

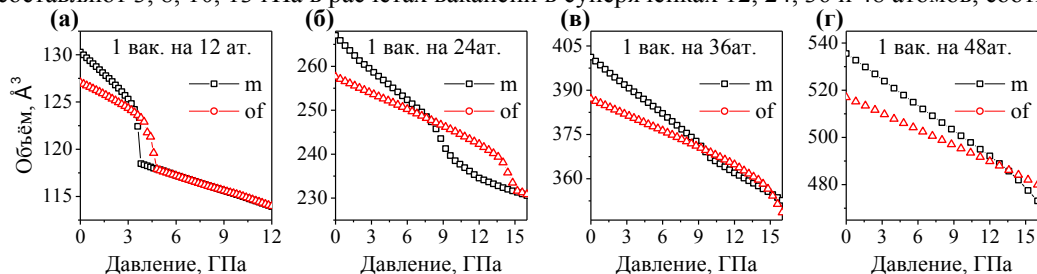


рис. 1. Зависимость объёма элементарных ячеек m- и $\text{of-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ от величины внешнего давления.

Для любой концентрации вакансий О энтальпия of- фазы $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ не бывает меньше энтальпии m- , oI и oII фаз (рис. 2). Вакансии О положительно сказываются на стабилизации $\text{oII-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$. Как и для бездефектных кристаллов, $\text{of-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ является нестабильным для кристаллов с вакансиями кислорода при любой величине внешнего давления, при которой структура способна существовать. Таким образом, наличие вакансий О негативно сказывается на возможности стабилизации ферроэлектрической фазы. Данный результат согласуется с гипотезой, что деградация тестовых структур FRAM обусловлена генерацией вакансий О.

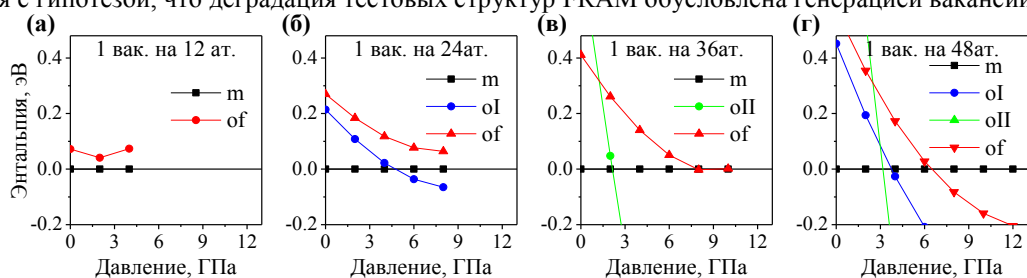


рис. 2. Энтальпия орторомбических фаз и $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ по отношению к энтальпии моноклинной фазы $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$, рассчитанная для кристаллов с различной концентрацией вакансий кислорода.

Список публикаций:

- [1] J. Müller, T.S. Böske, D. Bräuhäus, U. Schröder, U. Böttger, J. Sundqvist, P. Kücher, T. Mikolajick and L. Frey, *Appl. Phys. Lett.* 99, 112901 (2011).
- [2] F.P.G. Fengler, R. Nigon, P. Murali, E.D. Grimley, X. Sang, V. Sessi, R. Hentschel, J.M. LeBeau, T. Mikolajick and U. Schroeder, *Adv. Electron. Mater.* 4, 1700547 (2018).

Влияние ион-селективных примесей на спектры импеданса жидких кристаллов

Петрова Кристина Павловна

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

Хазимуллин Максим Вильевич, к.ф.-м.н.

krispet98@gmail.com

Механизмы транспорта электрического заряда в органических соединениях являются предметом активного исследования современной физики конденсированного состояния. Жидкие кристаллы представляют собой органические жидкости с небольшой проводимостью, вызванной примесными ионами, содержание и свойства которых часто не известны. Метод импедансной спектроскопии позволяет получить количественные оценки параметров ионов (подвижность и концентрацию). Однако свойства положительных и отрицательных носителей зарядов стандартными средствами импеданс-спектроскопии различить не удастся. В данной работе для определения свойств ионов разного знака были выполнены измерения и анализ импеданс-спектров жидких кристаллов, допированных ион-селективными молекулами – макроциклическими полиэфирами (краун-эфирами), способными присоединять ионы определенного знака.

Спектры импеданса “чистого” и допированного жидкого кристалла МБА измерялись в плоскопараллельных ячейках с электродами, покрытых тонкой полимерной пленкой полиимида. Допирование